

Сведения о выполненных работах
в период с 27.07.2021 г. по 30.06.2022 г.

по проекту «**Математическое моделирование статистической механики
взаимодействующих закрученных частиц и ее приложения**»,
поддержанному Российским научным фондом

Соглашение № 21-71-10066

Руководитель: Капарулин Дмитрий Сергеевич, канд. физ.-мат. наук

Разработана квазиклассическая теория киральных эффектов во вращающемся идеальном газе спиновых частиц, основанная на классическом описании спиновой степени свободы и принципах классической статистической механики. Построена новая модель массивной классической нерелятивистской точечной спиновой частицы, в которой состояние системы задается радиус-вектором, импульсом и двумя угловыми переменными, характеризующими направление спинового углового момента. Показано, что фазовое пространство системы дается прямым произведением $R^6 \times S^2$, где множитель R^6 описывает поступательные степени свободы, а множитель S^2 – спин. Определена инвариантная норма на фазовом пространстве, которая дается произведением инвариантных норм на линейном пространстве и сфере. Построен вращающийся с постоянной угловой скоростью канонический ансамбль, содержащий фиксированное значение спиновых частиц. Построена функция распределения частиц по состояниям в ансамбле. Построена одночастичная функция распределения по импульсам, координатам и направлениям спина в зависимости от угловой скорости. Показано, что при наличии макроскопического вращения имеет место преимущественная ориентация собственных угловых моментов частиц вдоль вектора угловой скорости. Вычислена каноническая статистическая сумма. Показано, что она определяет термодинамический потенциал системы с естественными переменными: температура, угловая скорость, число частиц. Этот термодинамический потенциал является аналогом свободной энергии Гиббса в которой пара сопряжённых переменных давление-объем заменена на пару угловая скорость-угловой момент. Энтропия, полный угловой момент и химический потенциал получены как функции температуры и угловой скорости. Получено выражение для теплоемкости газа при постоянном значении угловой скорости. Даны оценки величины киральных эффектов.

Разработана статистическая механика вращающихся систем невзаимодействующих симметричных классических и квантовых молекулярных ротаторов типа фуллеренов C_{60} с орбитальным угловым моментом. В рамках классического описания построен ансамбль ротаторов, вращающийся с постоянной угловой скоростью вокруг фиксированной оси. Построена функция распределения ротаторов по направлению и величине собственного углового момента. Одночастичная функция распределения по угловым вид распределения Гаусса, центрированного на $I \backslash \Omega$, где I – угловой момент, а $\backslash \Omega$ – угловая скорость. Дисперсия распределения определяется температурой. На основании анализа

полученных данных сделан вывод об увлечении вращательных степеней свободы ротатора в результате макроскопического вращения. Выполнена оценка количества энергии, запасенной во вращательных степенях свободы. В рамках квантового описания построен ансамбль квантовых ротаторов, вращающийся с постоянной угловой скоростью. Найдена статистическая функция распределения системы и одночастичная функция распределения по состояниям отдельного ротатора. Показано, что для системы имеются два принципиально различных режима работы. В случае медленного вращения, система находится преимущественно в основном состоянии с нулевым значением углового момента. В случае высоких угловых скоростей происходит возбуждение вращательных степеней свободы со все возрастающими значениями орбитального квантового числа. В пределе нулевой абсолютной температуры, возбуждение становится скачкообразным, так что имеет место фазовый переход. Таким образом, было продемонстрировано, что небольшие изменения угловой скорости в системе ультрахолодных квантовых ротаторов могут приводить к значительным изменениям макроскопических параметров, в частности внутренней энергии и энтропии.

Сформулирована и решена задача об описании вращательно-поступательного движения молекулы фуллерена C₆₀ в кристалле фуллерита средствами молекулярной динамики. Получены новые данные о поведении фуллеренов в структуре кристалла при ударной деформации кристалла. Показано, что при подходящем выборе направлении воздействия имеет место смещение молекул фуллерена в плоскости ортогональной направлению силы, то есть имеет место эффект качения. Величина смещения молекулы сложным образом зависит от величины приложенного воздействия. Исследована вращательная динамика группы углеродных нанотубов, расположенных рядом друг с другом. Показано, что нанотубы осуществляют направленное вращательное межмолекулярное взаимодействие. При этом, групповое вращательное движение сохраняется даже при достаточно больших значениях угловой скорости. Найдены диапазоны угловых скоростей, при которых возникает групповое вращательное движение, при различных сочетаниях направленности собственного вращения нанотубов. В представленной вычислительной работе проведена оценка влияния тепловых колебаний на способность инкапсулированного фуллерена сохранять вращательное движение в фуллереновом комплексе C₈₀@C₃₂₀. Установлено, что чем выше начальная угловая скорость внутреннего фуллерена, тем более выраженной является указанная способность. Продемонстрировано, что C₈₀ можно раскручивать до тех пор, пока центробежная сила не разрушит его каркасную структуру. В результате сыпучая среда, составленная рассматриваемыми фуллереновыми комплексами, будет иметь возможность накапливать значительное количество энергии на внутренних вращательных степенях свободы. При этом, если C₈₀ будет интеркалирован железом, то система бифуллереновых частиц будет обладать выраженными магнитными свойствами.

Проведено численное моделирование динамики нерелятивистской квантовой спиновой частицы, находящейся в потенциальной яме цилиндрической или сферической формы, в том числе, при наличии внешнего магнитного поля. В случае

цилиндрической потенциальной ямы рассмотрен вариант уравнения Шредингера (уравнения Паули) с произвольным значением спина и магнитным полем, направленным вдоль оси симметрии цилиндра. Показано, что зависимость плотности локализации стационарных состояний от расстояния от оси цилиндра определяется функцией Куммера, а энергии стационарных состояний определяются нулями вырожденной гипергеометрической функции относительно ее первого параметра. Значения энергий состояний с небольшими значениями квантовых чисел получены с помощью численного моделирования. В случае больших квантовых чисел, волновые функции и энергии стационарных состояний найдены асимптотически. В модели сферической потенциальной ямы, рассмотрен вариант уравнения Шредингера без внешнего магнитного поля.